

2-(3-巯基-2-吡啶基)苯并咪唑分子内质子转移及溶剂化效应

彭洪亮, 于贤勇, 易平贵, 汪朝旭, 李筱芳, 王涛, 周继明

湖南科技大学化学工程学院, 理论化学与分子模拟省部共建教育部重点实验室, 分子构效关系湖南省普通高等学校重点实验室, 湖南 湘潭411201

摘要:

在B3LYP/6-31G(d,p)和TD B3LYP/6-31+G(d,p)//CIS/6-31G(d,p)水平上, 研究了2-(3-巯基-2-吡啶基)苯并咪唑(MPyBI)在气相和七种溶剂(环己烷、苯、三氯甲烷、乙醇、乙腈、二甲亚砜和水)中基态和激发态的分子内质子转移(GSIPT和ESIPT)过程. 在基态势能面的研究中发现, 该化合物存在其中分步的双质子转移在动力学上具有优势. 同时对比激发态质子转移势能面及激发态转移过程中的光物理现象进行了研究, 结果表明该化合物存在快速的无能垒的激发态分子内质子转移, 随着溶剂极性的增强, 可以降低基态过态的能垒, 改变疏醇式与疏酮式互变异构异构体的比例, 从而灵敏地控制

关键词: 密度泛函理论 2-(3-巯基-2-吡啶基)苯并咪唑 分子内质子转移 极化连续介质模型

收稿日期 2009-07-01 修回日期 2009-09-21 网络版发布日期 2009-12-02

通讯作者: 易平贵 Email: yipinggui@sohu.com

本刊中的类似文章

1. 李宝宗: 2-硫代黄嘌呤互变异构体的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 2004, 20(12): 1455-1458
2. 郭彩虹: 贾建峰; 郭玲; 武海顺. Ga₃P_y(x+y=8)及其阴离子簇的结构与性质的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(10): 1253-1259
3. 王岩; 曾小兰; 汪玲. 硅杂苯与亲二烯体的Diels-Alder反应[J]. 物理化学学报, 2009, 25(02): 371-376
4. 崔明侠; 董士红; 王文亮; 尹世伟; 吕剑. 4-(1,2-二甲基)乙烯基-4'-(N,N-二甲基-4-乙烯基氨基)联苯及其二氟取代衍生物的电子结构与光谱性质[J]. 物理化学学报, 2009, 25(02): 347-352
5. 游晓莉; 徐布一; 李权; 赵可清. 咪唑类生色分子的电子光谱和非线性光学性质[J]. 物理化学学报, 2009, 25(02): 314-318
6. 陈锦灿; 李俊; 吴文娟; 郑康成. 系列异构配合物Ru(azpy)₂Cl₂的结构与抗癌活性[J]. 物理化学学报, 2006, 22(04): 391-396
7. 李权; 王艳艳; 蒋刚; 朱正和; PuX+(X=H, O, N, C)的结构与势能函数[J]. 物理化学学报, 2001, 17(07): 622-625
8. 周世琦; 张晓祺. 一个新的桥泛函及其在非均一流体密度泛函理论中的应用[J]. 物理化学学报, 2002, 18(08): 699-704
9. 薛卫东; 张广丰; 朱正和; 汪小琳; 罗德礼; 邹尔西; 孙颖. CO₂二聚体分子弱结合作用的DFT计算[J]. 物理化学学报, 2001, 17(06): 501-506
10. 武海顺; 许小红; 张聪杰; 张富强. (XN)4R4簇合物的结构与化学键 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(02): 127-130
11. 刘幼成; 蒋刚; 朱正和. NX(X=F, Cl, Br)分子结构与极化函数轨道的作用 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(02): 117-121
12. 艾洪奇; 步宇翔. 黄金规则用于N₃⁺+N₃体系电子转移的研究[J]. 物理化学学报, 2001, 17(03): 210-215
13. 王遵尧; 肖鹤鸣; 李金山. F+Cl₂->ClF+Cl和ClF+Cl->Cl'+ClF的反应机理[J]. 物理化学学报, 2001, 17(02): 107-110
14. 王繁; 黎乐民. 高精度相对论密度泛函计算方法[J]. 物理化学学报, 2004, 20(08S): 966-973
15. 曹梅娟; 陈文凯; 刘书红; 许莹; 李俊钺. 苯在Au(100)表面化学吸附的周期性密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(01): 11-15
16. 封学军; 李前树. 全氟代金刚烷及其自由基的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(09): 1172-1174
17. 林伟; 章永凡; 李奕; 陈勇; 李俊钺. SnO₂(110)弛豫表面构型与电子结构的第一性原理研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(01): 76-81
18. 胡兴邦; 李浩然; 梁婉春; 韩世钧. 水对5-氟尿嘧啶质子转移影响规律的研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(09): 952-956
19. 吕玲玲; 王永成. Au⁺(¹S, ³D)与N₂O(¹Σ⁺)反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(03): 265-269
20. 张敬来; 王连英; 吴文娟. 曹泽星. 线性簇合物SC_{2n}S²⁻(n=1~12)电子吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2004, 20(12): 1428-1433
21. 耿志远; 王永成; 汪汉卿. 锗烯X₂Ge(X=H, CH₃, F, Cl, Br)与乙烯环加成反应的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(12): 1417-1422
22. 徐灿; 朱莉芳; 高晨阳; 曹娟. 硅氧团簇(SiO₂)_nO₂H₄的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(02): 152-155
23. 黄帆 ; 张家兴; 李锐; 申自强; 侯士敏; 赵兴钰; 薛增泉; 吴全德. Al-C₆₀-Al分子结电子输运特性的第一性原理计算[J]. 物理化学学报, 2006, 22(02): 161-166
24. 马文瑾; 武海顺. Al_mN₂⁻ (m=1~8)团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2006, 22(02): 178-182
25. 罗小玲; 唐典勇; 李明. 氢甲酰化反应溶剂效应的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(12): 1404-1410
26. 高立国; 王永成; 耿志远; 陈晓霞; 吕玲玲; 戴国梁; 王冬梅. 气相中Sc⁺和Ti⁺与CS₂反应的计算研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(10): 1102-1107
27. 章应辉; 阮文娟; 吴扬. 密度泛函理论研究5-单苯基咪啉分子的几何结构和拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 2005, 21(12): 1390-1394
28. 方冉; 耿志远; 王永成; 张兴辉; 王冬梅; 高立国; 陈晓霞. 锗烯X₂Ge与环硫乙烷硫转移反应的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(12): 1331-1336
29. 赵材荣; 陈宏善; 陈玉红; 冯旺军; 李维学; 许广济; 寇生中. Al₆P₈团簇环状结构与性质的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(12): 1368-1372
30. 朱孟强; 潘翎; 刘涛; 李贤良; 杨玉环; 李薇; 李晋; 胡天斗; 吴自玉; 谢亚宁. 用密度泛函和XANES计算研究Zn²⁺在水锰矿表面的吸附和沉淀[J]. 物理化学学报, 2005, 21(12): 1378-1383
31. 朱瑜; 蒋刚; 于桂凤; 朱正和; 王和义; 傅依备. N₂在Pd金属表面的吸附行为[J]. 物理化学学报, 2005, 21(12): 1343-1346
32. 陈文凯; 曹梅娟; 刘书红; 许莹; 李奕; 李俊钺. 苯分子在Cu(100)面平板模型上吸附的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(08): 903-908
33. 李会英; 蒲敏; 陈标华. DFT法研究分子筛催化trans-2-丁烯的双键异构[J]. 物理化学学报, 2005, 21(08): 898-902
34. 和序; 周立新. 铂配合物与DNA碱基对间相互作用的理论研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(08): 846-851
35. 王艳艳; 邹建卫; 胡桂香; 邓何文; 俞庆森. 吡咯咪唑酮模型化合物与氟核加成的理论探讨[J]. 物理化学学报, 2004, 20(09): 1129-1133
36. 王永成; 戴国梁; 耿志远; 吕玲玲; 王冬梅. 乙烯自由基与臭氧反应的DFT计算研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(09): 1071-1077
37. 张东东, 周立新. 含平面胺配体的反式二价钡配合物与DNA碱基的作用[J]. 物理化学学报, 2009, 25(12): 2551-2557
38. 王清高, 杨宗献, 危书义. 水分子和二氧化铈(111)表面相互作用的DFT+U研究[J]. 物理化学学报, 2009, 25(12): 2513-2518
39. 马淳安, 刘婷, 陈丽涛. CO和H在Pt/WC(0001)表面的吸附[J]. 物理化学学报, 0, 0: 0-0
40. 任雪峰, 任爱民, 王钦, 封继康. meso取代卟啉衍生物的结构和光学性质[J]. 物理化学学报, 0, 0: 0-0
41. 陈晓华, 樊永明, 曹春显, 胡红智. 酞型木素模型物的光学特性[J]. 物理化学学报, 0, 0: 0-0
42. 蒲敏; 陈标华; 李会英; 刘坤辉. DFT法研究离子液中EMIM⁺催化丁烯双键异构反应机理(I)[J]. 物理化学学报, 2005, 21(04): 383-387
43. 任彦亮; 万坚; 刘俊军; 万洪文. 吡啶垂直激发态的理论研究方法的比较[J]. 物理化学学报, 2004, 20(09): 1089-1092
44. 陈人杰; 高锋. 高氯酸锂-乙酰胺新型二元熔盐电解质的谱学研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(02): 177-181
45. 周俊红; 曾艳丽; 孟令鹏; 郑世钧. ClO与ClO自由基反应机理及电子密度拓扑分析[J]. 物理化学学报, 2005, 21(02): 166-172
46. 李永红; 陈丽萍; 徐文媛; 洪三国. 2-溴丙酸气相热消除反应的机理[J]. 物理化学学报, 2003, 19(05): 389-392
47. 徐艺军; 李俊钺; 章永凡; 陈文凯. O₂在MgO(001)完整和缺陷表面上的吸附[J]. 物理化学学报, 2003, 19(05): 414-418
48. 邵晓红; 张仁仁; 汪文川. 密度泛函与分子模拟计算孔径分布比较[J]. 物理化学学报, 2003, 19(06): 538-542
49. 李宝宗. 6-硫代黄嘌呤互变异构体的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 2004, 20(05): 503-506
50. 苗月; 袁宏宽; 陈洪. 双钙钛矿Sr_{2-x}La_xCrReO₆的电子结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2008, 24(03): 448-452
51. 晋倩; 倪哲明; 潘国祥; 陈丽涛; 刘婷. 水滑石限域空间中Cl⁻与H₂O的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2008, 24(04): 601-606
52. 吴阳; 冯璐; 张向东. C₆H₅-H...X分子间氢键的理论计算[J]. 物理化学学报, 2008, 24(04): 653-658
53. 李志伟; 李香芝; 许先芳; 赵存元; 陈六平. NaP₄及其正负离子的结构和光谱性质[J]. 物理化学学报, 2008, 24(04): 670-674
54. 孙慧卿; 丁少锋; 王雨田; 邓贝; 范广涌. CdO及Cd₂Zn_{1-x}O化合物的结构、能量和电子性能分析[J]. 物理化学学报, 2008, 24(07): 1233-1238
55. 罗世霞; 张笑一; 张思孝; 朱淮武; 胡继伟; 卫钢. 羧基偶氮苯分子电子传输的取代基效应[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1471-1476
56. 马文瑾; 张献明; 许小红; 王艳艳; 武海顺. C_nAl₂ (n=1-10)团簇的结构特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1477-1480
57. 王云海; 刘永东; 罗云敬; 钟儒刚. 过氧亚硝酸与酪氨酸的反应机理[J]. 物理化学学报, 2008, 24(07): 1207-1213
58. 赵材荣, 陈宏善, 陈玉红, 魏智强, 蒲忠胜. 亚甲基富勒烯衍生物[6,6]-苯基-C₆₁-丁酸甲酯的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1353-1358
59. 张旭, 储伟, 陈建伟, 戴晓雁. 甲醇醇引发的环氧乙烷开环聚合反应过程[J]. 物理化学学报, 2009, 25(03): 451-456
60. 刘述斌. 概念密度泛函理论及近来的一些进展[J]. 物理化学学报, 2009, 25(03): 590-600
61. 罗小艳; 贾文红; 张聪杰. In_nNa和In_nNa⁺ (n=2-8)的团簇结构和电子性质[J]. 物理化学学报, 2009, 25(02): 261-266
62. 洪功义; 黎乐民; 徐光宪; 林宪杰. 单羧基酮的键合异构现象[J]. 物理化学学报, 1995, 11(06): 481-483
63. 孙宝珍; 陈文凯; 徐香兰. NO双分子在Cu₂O(111)面吸附与解离的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(09): 1126-1131
64. 张华; 陈小华; 张振华; 邱明. 接枝基对有限碳纳米管电子结构的影响[J]. 物理化学学报, 2006, 22(09): 1101-1105

145. 喻典;陈志达;王黎;李述周.元素电负性和硬度的密度泛函理论研究[J].物理化学学报,2001,17(01):15-22
146. 郭森立;侯廷军;徐筱杰;张斌;朱道本.一个新BEDT-TTF电荷转移盐的晶体结构预测[J].物理化学学报,2002,18(04):289-91
147. 李权;徐成刚;王红艳;朱正和;PuH₂气态分子热力学稳定性的理论研究[J].物理化学学报,2002,18(10):952-955
148. 陈文凯;许娇;章永凡;周立新;李俊钺.2-羟基吡啶质子转移过程的理论研究[J].物理化学学报,2002,18(09):802-807
149. 李凤仪;徐文斌;余军文.二氯甲基硅烷醇解的量化计算[J].物理化学学报,2003,19(04):338-341
150. 张远;曹彦华;孙岳明;刘举正;顾瑾.NO双分子和二聚体与Cu₂作用的理论计算[J].物理化学学报,2003,19(03):193-197
151. 曹阳;吕春绪;吕早生;蔡春;魏运洋;李斌栋.硝酰阳离子和二氧化氮分子的弯曲变形研究[J].物理化学学报,2002,18(06):527-531
152. 蔡建秋;陶向明;谭明秋.氮原子吸附的Cu(100)表面原子结构和电子态[J].物理化学学报,2007,23(03):355-360
153. 王云海;刘永东;罗云敬;张伟;钟儒刚.过氧亚硝酸与苯酚的反应机理理论研究[J].物理化学学报,2006,22(10):1266-1271
154. 杨振;徐志军;杨晓宁.基于密度泛函理论研究二元排斥Yukawa流体的表面结构性质[J].物理化学学报,2006,22(12):1460-1465
155. 张树强;王雅琼;郑旭明.硝基羟光异构化反应的密度泛函理论计算[J].物理化学学报,2006,22(12):1489-1494
156. 李权;李德华;盛勇;朱正和;PdYⁿ⁺(n=0,1,2,3)分子离子的结构与稳定性[J].物理化学学报,2006,22(12):1516-1519
157. 马文璠;王艳宾;张静;武海顺. BmN (m=2~9)团簇结构的特征与稳定性[J].物理化学学报,2007,23(02):169-172
158. 孟现美;黄晓明;王传奎.有机杂环分子的双光子吸收特性[J].物理化学学报,2007,23(02):228-231
159. 田蒙奎;蒋丽;上官文峰;王世杰;欧阳自远.可见光响应光催化剂K₄Ce₂Ta₁₀O₃₀、K₄Ce₂Nb₁₀O₃₀及其固溶体的电子结构[J].物理化学学报,2007,23(04):466-472
160. 蒋仕宇;滕波涛;袁金焕;郭晓伟;罗孟飞.CO在CeO₂(111)表面的吸附与氧化[J].物理化学学报,2009,25(08):1629-1634
161. 梁晓静;崔丽;吴德印;田中群.腺嘌呤和质子化腺嘌呤的结构和振动光谱[J].物理化学学报,2009,25(08):1605-1610
162. 张子英;杨德林;刘云虎;曹海滨;邵建新;井群.BaTiO₃的电子结构和光学性质[J].物理化学学报,2009,25(09):1731-1736
163. 吴阳;张甜甜;于宁.1-乙基-3-甲基咪唑阳离子与天冬酰胺阴离子的相互作用[J].物理化学学报,2009,25(08):1689-1696
164. 杨相艳;张宜恒;丁兰;汪汉卿.一种天然产物Wangzaozin A的细胞毒活性[J].物理化学学报,2009,25(09):1749-1755
165. 陈毓敏;邓珂;裴晓辉;王琛.一氧化碳共吸附法确定叔丁胺分子在Cu(111)表面的吸附位[J].物理化学学报,2009,25(08):1485-1489
166. 原现瑞;黄振华;李润岩;刘英华;陈晓霞;张慧丽;修勇.N-平基酰胺分子的氮-氢键旋转位阻及分子构象[J].物理化学学报,2009,25(09):1785-1790
167. 罗姗姗;仇永清;刘晓东;刘春光;苏忠民.含有咪唑生色团的Y-型有机分子的二阶非线性光学性质[J].物理化学学报,2009,25(09):1867-1873
168. 张美一;何广智;丁程程;陈灏;潘俐.As(V)在TiO₂表面的吸附机理[J].物理化学学报,2009,25(10):2034-2038
169. 梁锦霞;贾文红;张聪杰;曹泽星.包含平面四配位和五配位碳原子的特殊硼碳化合物[J].物理化学学报,2009,25(09):1847-1852
170. 张福兰;李来才;田安民.乙烷在Ni(111)表面的吸附和解离[J].物理化学学报,2009,25(09):1883-1889
171. 詹卫伸;潘石;李源作;陈茂笃.二氮啉类染料用于染料敏化太阳能电池光敏剂的比较[J].物理化学学报,2009,25(10):2087-2092
172. 朱玥;蒲敏;何静.EVANS David G.偶氮苯磺酸衍生物的致顺反异构化机理[J].物理化学学报,2009,25(11):2296-2304
173. 赵新新;陶向明;宓一鸣;陈戎;谭明秋.Ni(110)-p2mg(2×1)-CO表面的几何结构和电子态[J].物理化学学报,2009,25(11):2305-2311
174. 杨宗献;于小虎;马东伟.氧原子在具有Pt皮肤的Pt₃Ni(111)表面的吸附和扩散[J].物理化学学报,2009,25(11):2329-2335
175. 倪哲明;胥倩;姚萍;毛江洪;刘晓明.层间水含量对Mg₃Al-LDHs-Cl力学特性的影响[J].物理化学学报,2009,25(11):2325-2328
176. 吕存琴;凌开成;王贵昌.甲酸在清洁及磷改性Mo(100)表面的解离[J].物理化学学报,2009,25(11):2336-2342
177. 刘洁翔;魏贤;张晓光;韩恩山.Cu-[M]ⁿ⁺MOR和Ag-[M]ⁿ⁺MOR (M=B,Al,Ga,Fe)的酸性[J].物理化学学报,2009,25(10):2123-2129
178. 陈锦灿;陈兰美;廖思燕;郑康成.抗癌性钌配合物[HL][trans-Ru^{II}Cl₂L₂](L=2-NH₂-5-Me-STz)的水解机理[J].物理化学学报,2009,25(12):2543-2550
179. 左志军;黄伟;韩培德;李志红.CO和H₂分子在Cu(111)面的吸附和溶剂化效应[J].物理化学学报,2009,25(12):2507-2512
180. 刘建才;张新明;陈明安;唐建国;刘胜胆.密度泛函理论预测微量元素在Al(100)表面的偏聚[J].物理化学学报,2009,25(12):2519-2523
181. 徐晓芳;高敏;李红茹;张胜涛.生色团连接的苯酮三氮唑衍生物的激发态分子内质子转移[J].物理化学学报,0,(0):0-0
182. 何书珩;蒲敏;李军男;何静.EVANS David G.酸性橙插层铅铝水滑石的组装及其结构与性能[J].物理化学学报,0,(0):0-0
183. 赵亚华.含有一个非平面杂环配体的新型反铂抗癌药物的水解机理[J].物理化学学报,2009,25(11):2350-2356
184. 王会萍;白福全;郑清川;赵增霞;赵晓杰;张红星.咪唑啉异构体的电子结构和光学性质[J].物理化学学报,0,(0):0-0
185. 姜富灵;翟高红;丁黎;岳可芬;刘妮;史启植;文振翼.NO₂、OH、OH⁻对HMX初始热解的影响[J].物理化学学报,0,(0):0-0